

第一原理電子状態計算ソフトウェア

# PHASE

PHASE ver. 11.00  
UVSOR ver. 3.42  
PHASE-Viewer ver. 3.20  
ASCOT ver. 4.20

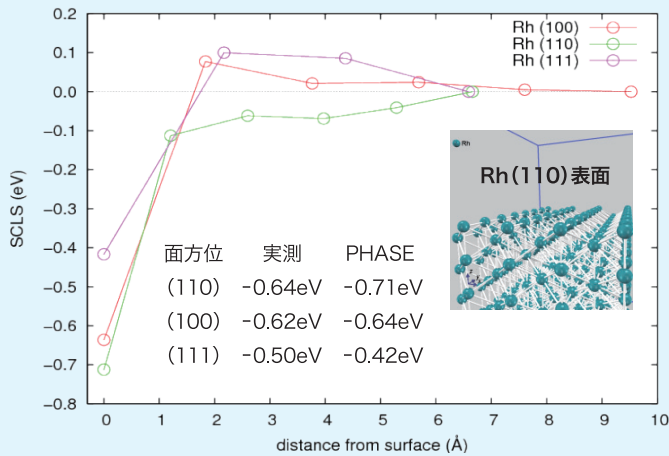
## 幅広い計算機プラットフォームに対応可能

ノートPC、PCクラスタからスパコンまで

密度汎関数理論に基づいた擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理電子状態解析ソフトウェア

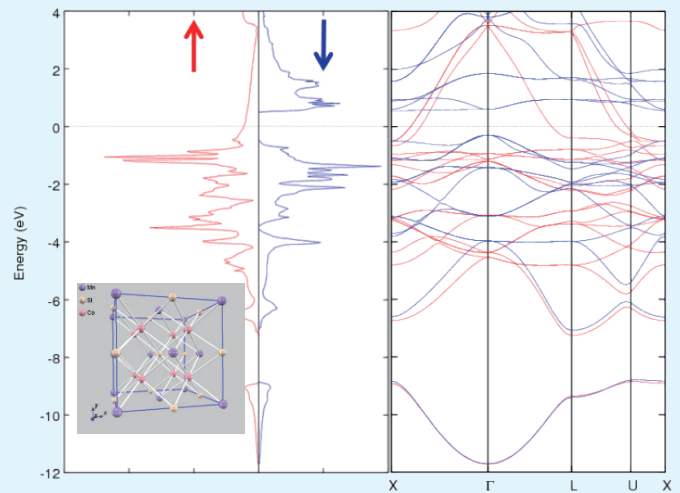
### 実証事例

#### 遷移金属のXPS解析



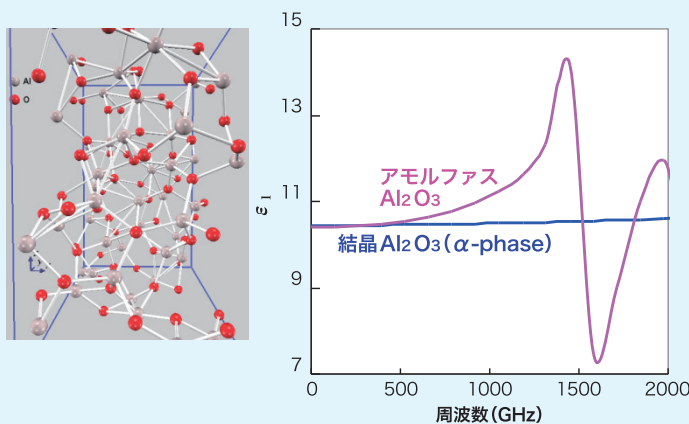
Rhの表面コアレベルシフトを計算。面方位による違いなども含め、実測値と良い一致が得られた。

#### ハーフメタル材料のバンド構造



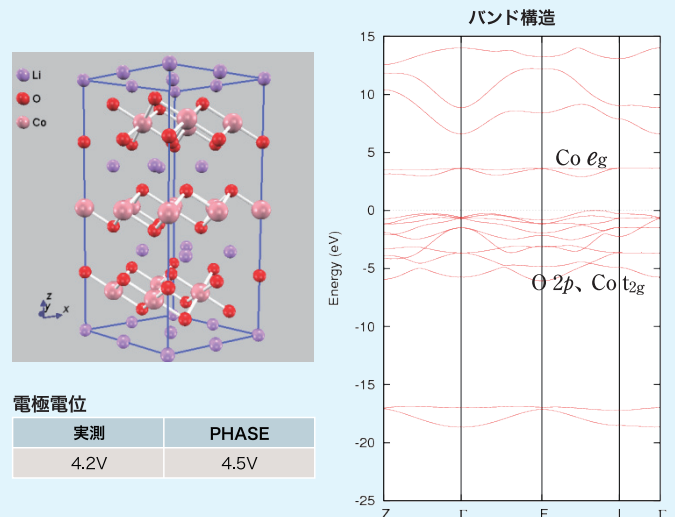
フルホイスラー合金 $\text{Co}_2\text{MnSi}$ のバンド構造を計算。アップスピンは金属的、ダウンスピンは絶縁体的なバンド構造が得られた。

#### テラヘルツ域誘電応答解析



アモルファス及び結晶アルミナの誘電関数。アモルファスと結晶誘電率は、テラヘルツ域で異なる。

#### リチウムイオン電池正極材料の電極電位解析

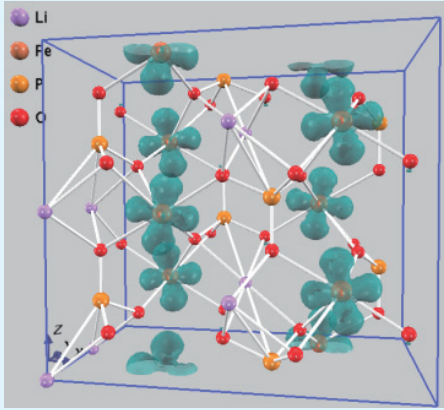


$\text{LiCoO}_2$ と $\text{CoO}_2$ のエネルギー差よりコバルト酸リチウムの電極電位を評価。実測値と良好な一致が得られた。

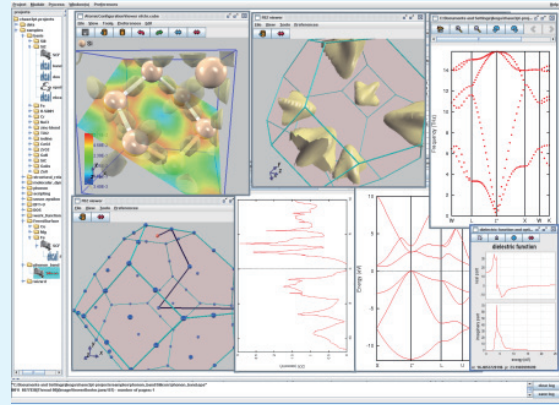
# 特徴的機能

- 金属・絶縁体・半導体など、あらゆる材料の取り扱いが可能
- 数万原子規模の系に対応可能な高い並列性能
- 対応プラットフォームは、WindowsPCから「京」まで
- 付属GUIと支援スクリプトによって、容易に実行が可能

LiFePO<sub>4</sub> フェルミレベル近傍における電荷密度



付属GUI PHASE-Viewer



# 機能一覧

基本機能	全エネルギー 電荷密度 構造最適化 状態密度 バンド構造
交換相関ポテンシャル	LDAおよびGGA
擬ポテンシャル	TM型擬ポテンシャル ウルトラソフト擬ポテンシャル PAWポテンシャル
分子動力学	エネルギー一定および温度一定
高精度な電子状態解析	DFT+U ハイブリッド汎関数 ファンデルワールス相互作用 TDDFT
化学反応解析	NEB法 Blue Moon法 メタダイナミクス法
その他解析機能	振動解析 ストレステンソル 弾性定数 STM XPS AFM 誘電関数(電子系および格子系)、非線形感受率、圧電定数 ワニエ関数
解析支援	入力作成および可視化用GUI付属 解析支援スクリプト付属

# 動作環境

OS : Linux (32bit/64bit)、Windows2000以降 (32bit/64bit)  
 ※Windowsは非並列バイナリー配布  
 コンパイラ : Fortran90 コンパイラ、Cコンパイラ  
 スーパーコンピュータ : 「京」、FX10(東大)、地球シミュレーター

PHASEは、国家プロジェクト等において開発され、文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野4次世代ものづくりの補助を受け高度化・整備を進めています。  
 PHASEは国立大学法人東京大学の登録商標です。その他の会社名、製品名等は、各社等の登録商標または商標です。



お気軽にお問い合わせ下さい：  
 ナノデバイスシミュレーションシステム研究開発グループ(大野)  
<http://www.ciiss.iis.u-tokyo.ac.jp/>  
<http://azuma.nims.go.jp>  
 e-mail: phase\_system\_ug@nims.go.jp



2013年12月